

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ ПРИ НАНОИНДЕНТИРОВАНИИ БИНАРНОГО СПЛАВА

Черненко С.А., Дудник Д.В.

Руководитель – доцент, к.ф.-м.н., Дудник Е.А.

Рубцовский индустриальный институт (филиал) ГОУ ВПО АлтГТУ им.

И.И.Ползунова, Рубцовск

zagaj@mail.ru

Исследования в области наноструктурного материаловедения способствуют выявлению закономерностей влияния структурных превращений на прочностные характеристики сплавов. Свойства материала при кратковременном контакте определяются динамикой структурных дефектов.

Целью данной работы является исследование влияния структурных превращений на прочностные характеристики упорядоченного сплава в области локальной деформации в процессе наноиндентирования.

Рассчитаны энергетические характеристики, представлены картины локальных смещений атомов, исследована эволюция дислокационной структуры упаковки атомных рядов в зависимости от глубины проникновения наноиндентора, построена диаграмма изменения нагрузки в зависимости от погружения наноиндентора $P(h)$.

В качестве объекта исследования взят двумерный модельный сплав Ni_3Al , компьютерный эксперимент проводится с использованием метода молекулярной динамики.

При разработке модели были приняты следующие основные положения и упрощения:

1. Распределение атомов соответствует в ГЦК решетке гексагональной атомной плоскости $\langle 111 \rangle$ сверхструктуры $L1_2$. Предполагается, что данный сплав лежит на подложке, которая не взаимодействует с атомами сплава. На границах расчетного блока, соответствующих направлению $\langle 121 \rangle$, наложены свободные граничные условия, а в направлении $\langle 110 \rangle$ – периодические. Размер расчетного блока 24×24 элементарных ячеек и составляет 2304 атома. Сплав полностью упорядочен, координаты всех атомов задаются в соответствии с положением узлов в решетке.

2. Наноиндентор представляет собой правильный треугольник.

3. Величина скорости атомов в начальный момент времени задается равной значению наиболее вероятной скорости атомов согласно закону распределения Максвелла – Больцмана при заданной начальной температуре. Направления движения атомов в начальный момент времени рандомизированы.

4. Движение атомов рассчитывается методом молекулярной динамики по второму закону Ньютона. Задача Коши решается численным методом Эйлера с использованием центральных разностей.

5. Сила тяжести намного меньше силы взаимодействия между атомами и ею можно пренебречь.

6. Конечное значение температуры определялось через среднеквадратичную скорость атомов.

7. Межатомное взаимодействие между атомами задавалось потенциалом Морзе.

Массу наноиндентора M принимали равной 500 массам атомов никеля. Это соотношение выбирали из условий качественного соответствия процессов внедрения наноиндентора в вещество в модели и реальных экспериментах.

Перемещения наноиндентора на n -й итерации определяли по формуле:

$$\Delta h = \left(V + (F - F_{ax}) \cdot \frac{\Delta t}{M} \right) \cdot \Delta t, \quad (1)$$

где F – нагрузка, F_{ax} – сила, действующая со стороны модельной области, V – скорость наноиндентора на $(n-1)$ итерации. Силу F_{ax} находили как проекцию суммы всех сил, действующих со стороны атомов на наноиндентор, и определяющихся по второму закону Ньютона за промежуток времени Δt .

Твердость сплава определяется по формуле [1]:

$$H = P_{max} / F, \quad (2)$$

где P_{max} – величина приложенной нагрузки, F – площадь проекции отпечатка.

В результате проведенного эксперимента были получены картины атомных смещений при различной глубине вдавливания индентора при начальной температуре 100К и 300К.

При небольшой глубине вдавливания наблюдаются незначительные смещения атомов в области под наноиндентором, в основной части сплава смещений не наблюдается. При увеличении глубины вдавливания область локальной деформации под индентором расширяется, атомы перемещаются на поверхность, образуя «навалы». С увеличением температуры «навалы» образуются при меньшей глубине проникновения наноиндентора и занимают больший объем на поверхности.

Для исследования эволюции дислокационной системы получены картины упаковки атомных рядов в трех основных плотноупакованных кристаллографических направлениях в зависимости от глубины вдавливания. Дислокационная активность наблюдается при достижении глубины проникновения более 6 Å. При относительно низких температурах смещения атомов наблюдались в виде локальных дефектов упаковки и образования частичных дислокаций. С увеличением температуры вблизи наноиндентора образуются некристаллические области межузельных атомов, а дислокационные дефекты во всей области кристалла не наблюдаются.

Получены картины распределения областей разрыхления и уплотнения в зависимости от степени индентирования и температуры. При температуре 100К атомы, в объеме примыкающие к наноиндентору, уплотняются, а в зоне острия наноиндентора образуются области нарушения кристалличности, в основной же части расположение атомов не изменяется. При разгрузке происходит разрыхление областей атомов под индентором за счет освобождения занятого объема. С ростом температуры зоны нарушения кристалличности образуются в

областях «навалов» на поверхности кристалла, оставляя гладкой поверхность кристалла.

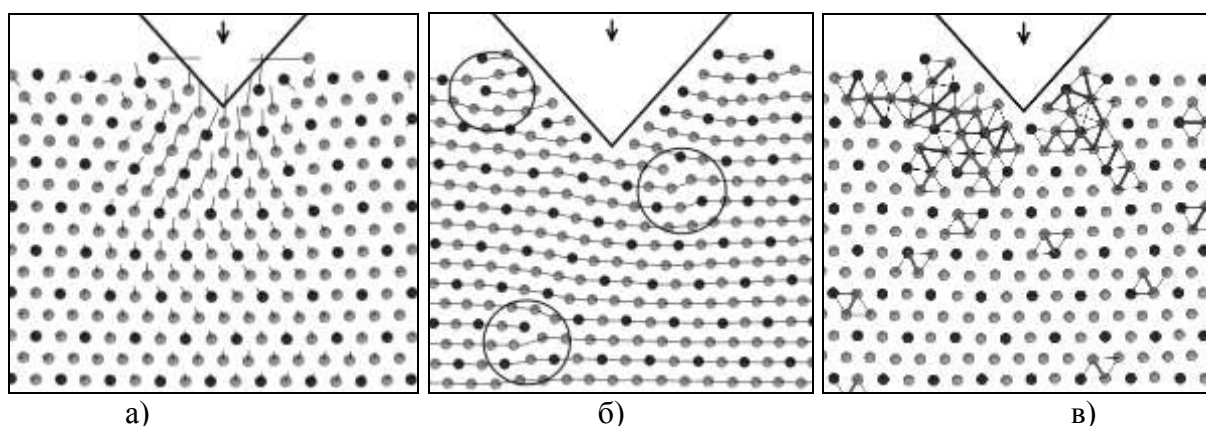


Рисунок 1. Картины структурных превращений при погружении наноиндентора в сплав Ni_3Al при различной температуре (а-0K, б-100K, в-300K)

Получена диаграмма изменения нагрузки в зависимости от погружения наноиндентора $P(h)$ в сплав Ni_3Al , с ростом температуры уменьшается глубина проникновения. При прекращении погружения наноиндентора он совершает затухающие колебания относительно положения равновесия. В реальных системах данное явление не зафиксировано из-за существенно большего различия масс наноиндентора и моделируемого материала.

Наноиндентирование при различных температурах приводит к образованию коллективного смещения атомов и характер структурных превращений различен. При относительно низких температурах замечена дислокационная активность в зоне под наноиндентором, наблюдались образования ступенек, краевых дислокаций после разгрузки. С ростом температуры твердость сплава увеличивалась за счет образования обширной зоны некристалличности в виде «навалов», сконцентрированных на поверхности сплава, отпечатки на поверхности гладкие. Полученные результаты моделирования оказались непротиворечивыми по отношению к экспериментальным исследованиям, проведенным ранее другими авторами.